

Prostorové plánování pro optimalizaci sítě měření znečištění ovzduší

Ctirad Matonoha, Marek Brabec

**Institute of Computer Science of the Czech Academy of Sciences
Pod Vodárenskou věží 2, 182 00 Prague 8**

PANM23, June 14 - 19, 2026, Hejnice



Tato práce vznikla v rámci projektu
TAČR ARAMIS č. SS02030031.



- 1 Úvod
- 2 Datová struktura
- 3 Konstrukce matic
- 4 Statistický model
- 5 Funkce rozptylu chyby predikce
- 6 Výsledky
- 7 Globální minimum
- 8 Software NOD
- 9 Závěr

- 1 Úvod
- 2 Datová struktura
- 3 Konstrukce matic
- 4 Statistický model
- 5 Funkce rozptylu chyby predikce
- 6 Výsledky
- 7 Globální minimum
- 8 Software NOD
- 9 Závěr

- Zabýváme se úlohou prostorového plánování týkající se optimálního rozšíření stávající sítě pro monitorování znečištění ovzduší.
- Pracujeme s přirozeným kritériem min-max optimality, jehož cílem je najít umístění nového měřicího bodu.
- Toto kritérium minimalizuje nejhorší možnou prostorovou chybu predikce na síti pokrývající sledovanou oblast.
- To tak poskytuje nejlepší umístění s ohledem na interpolaci z formálního statistického modelu.
- Vyvinuli jsme optimalizační algoritmus, který počítá umístění nového měřicího bodu ve sledované oblasti.

- Znečištění ovzduší patří k přetrvávajícím problémům ve světě.
- Má to důsledky pro lidské zdraví, produkci potravin a značný negativní dopad v mnoha dalších oblastech.
- Je důležité pravidelně sledovat hladiny vybraných znečišťujících látek, aby bylo možné zjistit prostorový rozsah problému, připravit legislativní opatření a zmírnit dopady.
- Za tímto účelem se měřicí sítě navrhují buď na základě apriorních znalostí odborníků nebo na základě optimalizace určitých formálních kritérií.
- Jakmile již nějaká síť existuje, je rozumné ji optimálně vylepšit (rozšířit) přidáním jednoho nebo více měřicích bodů.
- Východiskem je vytvoření prostorového statistického modelu, jehož parametry se odhadují na základě dat získaných prostřednictvím již existující sítě.

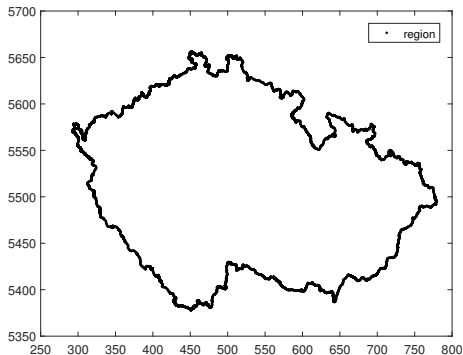
Co je cílem

- Umístění nových měřicích bodů se optimalizuje s ohledem na konkrétní kritérium, které obvykle závisí na neznámých parametrech, které je třeba nahradit jejich odhady.
- Mezi různými kritérii je přirozené uvažovat o min-max kritériu, které optimalizuje nejhorší přesnost v celé sledované oblasti.
- Když je oblast pokryta dostatečně hustou rovnoměrnou sítí, lze optimalizaci považovat za aproximaci problému ve spojitém prostoru.
- Poté se hledá umístění nového měřicího bodu (bodů) na síti tak, aby nejhorší přesnost (maximální standardní chyba predikce statistického modelu uvažovaná na celé síti) byla nejlepší ze všech možných umístění.
- Zatímco chyba predikce se vyhodnocuje pro celou síť, umístění nového měřicího bodu lze omezit na libovolnou podmnožinu.

- 1 Úvod
- 2 Datová struktura
- 3 Konstrukce matic
- 4 Statistický model
- 5 Funkce rozptylu chyby predikce
- 6 Výsledky
- 7 Globální minimum
- 8 Software NOD
- 9 Závěr

Oblast

V dané oblasti $A \in \mathbb{R}^2$ chceme sestavit mapu průměrné roční koncentrace určité plynné znečišťující látky (na základě statistické interpolace naměřených hodnot z měřicí sítě na této oblasti).



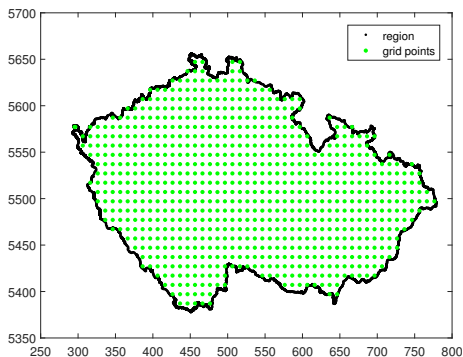
Uzlové body

Oblast rozdělíme na m stejnoměrně rozložených bodů

$$g_k = [g_k(i), g_k(j)], \quad k = 1, \dots, m. \quad (1)$$

Označme G jako sjednocení všech uzlových bodů:

$$g_k \in G \quad \forall k = 1, \dots, m.$$



Protože koncentrace dané látky je jiná a chová se jinak ve městě a mimo město, je každému uzlovému bodu g_k přiřazen specifický indikátor (obvykle hustota zalidnění) určující, zda tento bod leží ve městě nebo mimo něj.

Definujeme tedy funkci $I(g)$:

$$\begin{aligned} &\forall k = 1, \dots, m : \\ &I(g_k) = \begin{cases} 1 & \Leftrightarrow g_k \in M, & \text{pokud } g_k \text{ leží ve městě;} \\ 0 & \Leftrightarrow g_k \in P, & \text{naopak.} \end{cases} \quad (2) \end{aligned}$$

Kromě prostorových souřadnic $[i, j]$ a indikátoru město/neměsto předpokládáme, že v každém bodě g_k je k dispozici p souvisejících proměnných $\tilde{x}_k^{(1)}, \dots, \tilde{x}_k^{(p)}$, zvaných kovariáty. Např.

- nadmořská výška bodu g_k ,
- apriorní informace o koncentraci znečišťující látky získané na základě numerického vyhodnocení modelů.

Číslo p je obvykle malé, např. $p \approx 3$.

Zkonstruujeme $(p + 1)$ -dimensionální vektor

$$x_k(g_k) = \left(1, \tilde{x}_k^{(1)}, \dots, \tilde{x}_k^{(p)}\right)^T \in \mathbb{R}^{p+1}, \quad k = 1, \dots, m, \quad (3)$$

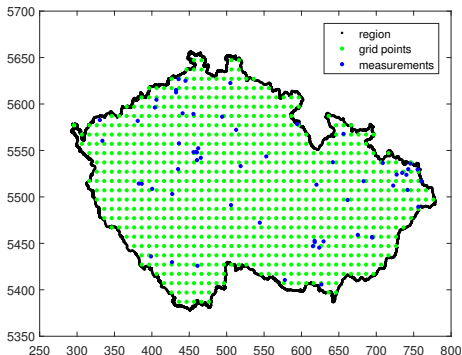
jehož první složka je rovna jedné a zbývajících p složek tvoří příslušné kovariáty.

Měřicí body

Je dána síť n měřicích bodů (stanic)

$$s_l = [s_l(i), s_l(j)], \quad l = 1, \dots, n \quad (4)$$

umístěných v oblasti A (ne nutně podmnožina uzlových bodů).



Funkce vzdálenosti dvou bodů

Pro každý bod s_l existuje nejbližší uzlový bod g_l k tomuto bodu.
Pro určení takového bodu použijeme vzdálenost

$$\begin{aligned}d_{kl} &= d(g_k, s_l) = \|g_k - s_l\| \\&= \sqrt{[g_k(i) - s_l(i)]^2 + [g_k(j) - s_l(j)]^2}.\end{aligned}\quad (5)$$

Nejbližší uzlový bod k s_l je takový bod g_l , který splňuje

$$g_l = \arg \min_{g_k \in G} d_{kl}.$$

To poslouží k určení, zda bod s_l leží ve městě nebo ne:

$$s_l \in M \quad \Leftrightarrow \quad g_l \in M.$$

Navíc každému měřicímu bodu s_l můžeme takto přiřadit vektor $x_l(s_l)$ obsahující kovariáty odpovídající nejbližšímu bodu g_l .

Konečně je dána množina kovariančních parametrů

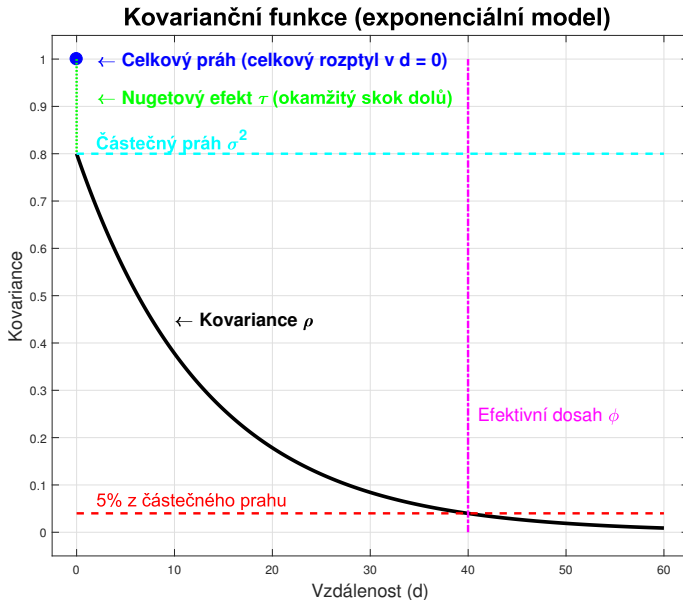
$$\theta = (\phi_P, \sigma_P, \phi_M, \sigma_M, \tau)^T \in \mathbb{R}^5 \quad (6)$$

- $\phi_P, \phi_M > 0$ jsou parametry dosahu korelace (vzdálenost, do které se body vzájemně ovlivňují/koreluje),
- $\sigma_P^2, \sigma_M^2 > 0$ jsou částečné prahové hodnoty (část rozptylu, která je skutečně způsobena prostorovým uspořádáním),
- $\tau > 0$ je tzv. nugetový efekt (extrémní variabilita hodnot mezi dvěma velmi blízkými vzorky).

Tyto parametry nejsou obecně známy, ale lze je odhadnout z dostupných dat (z pozorování v bodech s_l).

Jedním ze způsobů je použít Bayesovský model s rovnoměrným apriorním rozdělením a odhady vypočítat jako posteriorní průměry.

Kovariance



Cílem je danou měřicí síť bodů s_l , $l = 1, \dots, n$, rozšířit o novou měřicí stanici, jejíž umístění v oblasti A (nebo její podoblasti) je optimální na základě daného kriteria.

- 1 Úvod
- 2 Datová struktura
- 3 Konstrukce matic**
- 4 Statistický model
- 5 Funkce rozptylu chyby predikce
- 6 Výsledky
- 7 Globální minimum
- 8 Software NOD
- 9 Závěr

Z měřicích bodů s_l , $l = 1, \dots, n$, zkonstruujeme kovarianční matici $\Sigma \in \mathbb{R}^{n \times n}$ s prvky $\Sigma_{ij}(s_i, s_j)$ takto:

■ diagonální prvky:

$$\begin{aligned} \text{jestliže } s_i \in M & \Rightarrow \Sigma_{ii} = \sigma_M^2 + \sigma_P^2 + \tau^2 \\ \text{jinak} & \Rightarrow \Sigma_{ii} = \sigma_P^2 + \tau^2 \end{aligned}$$

■ mimodiagonální prvky:

$$\begin{aligned} \text{jestliže } s_i \in M \text{ a } s_j \in M & \Rightarrow \Sigma_{ij} = \varrho_M(d_{ij}) + \varrho_P(d_{ij}) \\ \text{jinak} & \Rightarrow \Sigma_{ij} = \varrho_P(d_{ij}) \end{aligned}$$

kde $d_{ij} = d(s_i, s_j)$ je funkce vzdálenosti (5).

Maternova kovarianční funkce

Funkce ϱ je Maternova kovarianční funkce

$$\varrho_I(d) = \frac{\sigma_I^2}{2^{\nu-1} \cdot \Gamma(\nu)} (k_I \cdot d)^\nu B_\nu(k_I \cdot d), \quad I \in \{M, P\},$$

kde

- $k_I = \sqrt{8\nu}/\phi_I$
- $\Gamma(\nu) = (\nu - 1)!$ je Gamma funkce
- B_ν je modifikovaná Besselova funkce druhého druhu řádu ν
- ν je konstanta – parametr hladkosti (např. $\nu = 1$)

Kovarianční matice jsou vždy symetrické a pozitivně definitní.

Z kovariátů $x_l(s_l) \in \mathbb{R}^{p+1}$ přiřazených měřicím bodům s_l , $l = 1, \dots, n$, zkonstruujeme obdélníkovou matici $X \in \mathbb{R}^{n \times (p+1)}$ takto:

$$X = \begin{bmatrix} x_1^T \\ x_2^T \\ \vdots \\ x_n^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1, \tilde{x}_1^{(1)}, \dots, \tilde{x}_1^{(p)} \\ 1, \tilde{x}_2^{(1)}, \dots, \tilde{x}_2^{(p)} \\ \vdots \\ 1, \tilde{x}_n^{(1)}, \dots, \tilde{x}_n^{(p)} \end{bmatrix} = [\mathbf{1}, \tilde{X}]$$

Předpokládáme, že X má plnou sloupcovou hodnotu.

- 1 Úvod
- 2 Datová struktura
- 3 Konstrukce matic
- 4 Statistický model**
- 5 Funkce rozptylu chyby predikce
- 6 Výsledky
- 7 Globální minimum
- 8 Software NOD
- 9 Závěr

Označíme-li měření znečišťujících látek v jednotlivých bodech s_l , $l = 1, \dots, n$, vektorem $Y = (Y_1, \dots, Y_n)^T$, vypadá úplný statistický model takto:

$$Y = \beta_0 \cdot \mathbf{1} + \beta \cdot \tilde{X}^T + \epsilon,$$

kde $\beta_0 \in \mathbb{R}$, $\beta \in \mathbb{R}^p$ jsou koeficienty.

Dále:

- $\mathbf{1} \in \mathbb{R}^n$ je vektor jedniček. Člen $\beta_0 \cdot \mathbf{1}$ odpovídá vlivu absolutního členu (skaláru β_0), který má být odhadnut na základě dat.
- $\tilde{X}^T = (\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_n) \in \mathbb{R}^{p \times n}$ je matice kovariátů, o nichž se předpokládá, že jsou ve všech uzlových bodech známé.

Vektor $\beta \in \mathbb{R}^P$ představuje neznámé regresní parametry (odhadují se na základě dat získaných z již existujících měřicích stanic).

Člen $\beta \cdot \tilde{X}^T$ umožňuje (obvykle vysoce nestacionární) chování systematické složky modelu.

V našich aplikacích máme 3 kovariáty:

- nadmořskou výšku
- výstupy ze dvou teoretických numericky vyhodnocovaných modelů znečištění ovzduší (CAMx a Symos, které jsou pravidelně vyhodnocovány na ČHMÚ, takže je lze snadno agregovat do odhadů numerického modelu průměrné roční koncentrace v každém uzlovém bodě).

Tyto výstupy poskytují nekalibrované, avšak prostorově podrobné apriorní informace o koncentracích, které jsou k dispozici bez nutnosti provádět vlastní měření koncentrací (jsou vypočítané na základě bilancí emisí a meteorologických měření).

Vektor $\epsilon \in \mathbb{R}$ je vektor náhodných prostorových efektů, který má vícerozměrné Gaussovo rozdělení s nulovým průměrem a kovarianční maticí Σ , která závisí na kovariančních parametrech θ :

$$\epsilon \sim N_n(\mathbf{0}, \Sigma).$$

Struktura těchto matic umožňuje modelovat nestacionární statistické chování koncentrací znečišťujících látek, které

- se vyznačují odlišným prostorovým rozsahem
- a odlišnou celkovou prahovou hodnotou v městských a venkovských oblastech.

Konkrétně se model kovariance opírá o

- městské náhodné pole,
- (nekorelovaný) městský přírůstek
- a k tomu přidanou (nekorelovanou) chybu měření.

Vícerozměrná Gaussova struktura je rozumnou aproximací dlouhodobých charakteristik, jako jsou roční průměry.

Identifikaci modelu (tj. odhad všech jeho parametrů na základě dostupných prostorových dat) lze v rámci bayesovského přístupu provést relativně jednoduše použitím apriorních rozdělání.

Ačkoli je možné odhad provést v rámci typických simulací pomocí metod Monte Carlo s Markovovým řetězcem z posteriorních rozdělání, výpočty jsou náročné, zejména u velkých dat (sítí).

V tomto případě je skutečně výhodné použít účinnou aproximaci bez simulace. V našich aplikacích byla použita metoda INLA (Iterated Nested Laplace Approximation).

- 1 Úvod
- 2 Datová struktura
- 3 Konstrukce matic
- 4 Statistický model
- 5 Funkce rozptylu chyby predikce**
- 6 Výsledky
- 7 Globální minimum
- 8 Software NOD
- 9 Závěr

Naše min-max kritérium pro optimalizaci návrhu vychází z celkové kvality statistického odhadu, který je založen na standardních chybách predikce (nebo ekvivalentně na rozptylu predikce, tj. jejich druhé mocnině) získaných ze statistického modelu, v němž jsou neznámé parametry nahrazeny jejich bayesovskými odhady získanými z INLA aproximace.

Funkce rozptylu chyby predikce je dána takto:

$$\begin{aligned} v_1(s_0) = & C(s_0) - c(s_0)^T \Sigma^{-1} c(s_0) \\ & + \left[x_0 - X^T \Sigma^{-1} c(s_0) \right]^T \\ & \cdot \left[X^T \Sigma^{-1} X \right]^{-1} \\ & \cdot \left[x_0 - X^T \Sigma^{-1} c(s_0) \right] \end{aligned} \quad (7)$$

kde $s_0 \in A$ a $x_0 = x_0(s_0) \in \mathbb{R}^{p+1}$.

Jestliže s_0 není uzlovým bodem, tj. $s_0 \notin G$, pak se bere jeho nejbližší uzlový bod $g_0 \in G$, $g_0 \in \{g_1, \dots, g_m\}$, k určení vektoru kovariátů x_0 a indikátoru město/neměsto.

První cíl

Dále, $c \in \mathbb{R}^n$ je kovarianční vektor s prvky:

$$\begin{array}{ll} \text{jestliže } s_0 \in M \text{ a } s_i \in M & \Rightarrow c_i(s_0) = \varrho_M(d_{0i}) + \varrho_P(d_{0i}) \\ \text{jinak} & \Rightarrow c_i(s_0) = \varrho_P(d_{0i}) \end{array}$$

a $C(s_0)$ je číslo:

$$\begin{array}{ll} \text{jestliže } s_0 \in M & \Rightarrow C = \sigma_M^2 + \sigma_P^2 + \tau^2 \\ \text{jinak} & \Rightarrow C = \sigma_P^2 + \tau^2 \end{array}$$

Prvním cílem je najít bod $s^* \in G$ takový, že

$$s^* = \arg \max_{s_0 \in G} v_1(s_0), \quad (8)$$

který odpovídá nejhoršímu případu (největší rozptyl na síti G).

Druhým a hlavním cílem je najít optimální umístění nového měřicího bodu s ohledem na min-max kritérium. Toto kritérium vyplývá přirozeně, když uvažujeme prostorovou interpolaci měřené veličiny v dané oblasti na základě konečné množiny měření dané proměnné (např. koncentrace látky znečišťující ovzduší).

Kvalita mapy/interpolace se poté vyhodnocuje ve všech bodech sítě a nejhorší případ je reprezentován maximem, které je třeba minimalizovat.

Zatímco maximální hodnota se vždy určuje pro celou síť, skutečné přípustné umístění nového měřicího bodu lze omezit na libovolnou podmnožinu G (nebo A).

Za tímto účelem vezměme libovolného kandidáta $s_k \in A$, který je různý od dosud existujících bodů s_l , $l = 1, \dots, n$.

Uvažujme rozšířenou (nebo o tento bod doplněnou) funkci rozptylu chyby predikce

$$\begin{aligned}\bar{v}_1(s_0) &= C(s_0) - \bar{c}(s_0)^T \bar{\Sigma}^{-1} \bar{c}(s_0) \\ &+ \left[x_0 - \bar{X}^T \bar{\Sigma}^{-1} \bar{c}(s_0) \right]^T \\ &\quad \cdot \left[\bar{X}^T \bar{\Sigma}^{-1} \bar{X} \right]^{-1} \\ &\quad \cdot \left[x_0 - \bar{X}^T \bar{\Sigma}^{-1} \bar{c}(s_0) \right]\end{aligned}\tag{9}$$

Rozšířené členy jsou

$$\bar{\Sigma} = \begin{bmatrix} \Sigma & \Sigma_k \\ \Sigma_k^T & \Sigma_{kk} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(n+1) \times (n+1)}$$

$$\bar{X} = \begin{bmatrix} X \\ x_k^T \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(n+1) \times (p+1)}$$

$$\bar{c}(s_0) = \begin{bmatrix} c(s_0) \\ c_k(s_0) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n+1}$$

Opět platí, že $\bar{\Sigma}$ jako kovarianční matice je symetrická a pozitivně definitní a $\bar{X}$ má plnou sloupcovou hodnotu.

Označme

$$\hat{v}_1(s_k) = \max_{s_0 \in G} \bar{v}_1(s_0).$$

Druhým a hlavním cílem je najít bod $\hat{s}^* \in G$ takový, že

$$\hat{s}^* = \arg \min_{s_k \in G} \hat{v}_1(s_k) = \arg \min_{s_k \in G} \{ \max_{s_0 \in G} \bar{v}_1(s_0) \}, \quad (10)$$

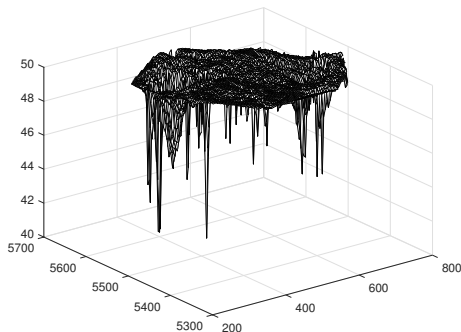
tj. mezi kandidáty $s_k \in G$ najít takového, u něž je maximální chyba mezi všemi uzlovými body $s_0 \in G$ nejmenší.

Zatímco maximum pro $\bar{v}_1(s_0)$ se vždy počítá pro všechny uzlové body $g_k \in G$, tj. $s_0 = g_k, \forall k = 1, \dots, m$, kandidáti s_k nemusí být vybíráni z celé sítě G , ale z libovolné podmnožiny G .

Příklad funkce $\hat{v}_1(s_k)$

V závislosti na vstupních datech (kovariátech, kovariančních parametrech) může být funkce $\hat{v}_1(s_k)$ lokálně velmi plochá s malými úzkými prohlubněmi v místech, kde se vyskytují lokální minima.

Příklad optimalizace měření NO_2 v České republice:



Důležitá otázka

Jestliže k funkci $v_1(s_0)$ přidáme kandidáta s_k a vytvoříme rozšířenou funkci $\bar{v}_1(s_0)$, může se chyba predikce zvětšit?

Zdá se, že by to bylo v rozporu s přirozenou intuicí, podle níž umístění nového měřicího bodu nemůže situaci zhoršit. Je však tato intuice skutečně správná?

Následující věta dává kladnou odpověď.

Věta

Nechť $\Sigma, \bar{\Sigma}$ jsou symetrické pozitivně definitní matice a $X, \bar{X}$ mají plnou sloupcovou hodnotu. Pak

$$\bar{v}_1(s_0) \leq v_1(s_0) \quad \forall s_0 \in A.$$

- 1 Úvod
- 2 Datová struktura
- 3 Konstrukce matic
- 4 Statistický model
- 5 Funkce rozptylu chyby predikce
- 6 Výsledky**
- 7 Globální minimum
- 8 Software NOD
- 9 Závěr

Shrnutí značení

Nejprve shrneme zavedené značení.

- Funkce rozptylu chyby predikce $v_1(s_0)$ je (7).
- Její maximum je

$$s^* = \arg \max_{s_0 \in G} v_1(s_0)$$

- Rozšířená funkce rozptylu chyby predikce $\bar{v}_1(s_0)$ je (9), kde pevné s_k je kandidát přidáný k $\bar{X}, \bar{\Sigma}, \bar{c}(s_0)$.
- Maximum $\bar{v}_1(s_0)$ pro pevné s_k je

$$\bar{s}^* = \arg \max_{s_0 \in G} \bar{v}_1(s_0)$$

- Označme kandidátní funkci

$$\hat{v}_1(s_k) = \max_{s_0 \in G} \bar{v}_1(s_0)$$

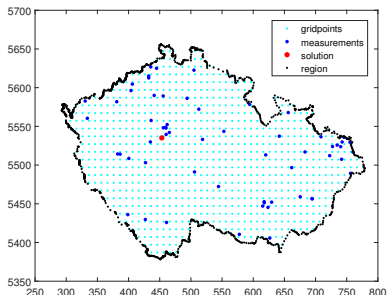
- Hledáme minimum

$$\hat{s}^* = \arg \min_{s_k \in G} \hat{v}_1(s_k) = \arg \min_{s_k \in G} \{ \max_{s_0 \in G} \bar{v}_1(s_0) \}$$

Řešení pro Českou republiku

Nechť je dána oblast G (Česká republika) obsahující konkrétní vstupní data a chceme najít řešení $\hat{s}^* = \arg \min_{s_k \in G} \hat{v}_1(s_k)$.

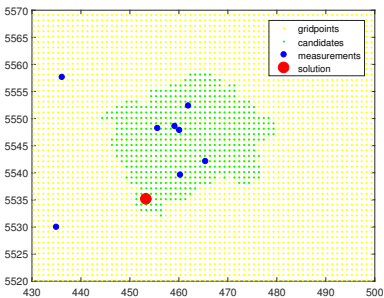
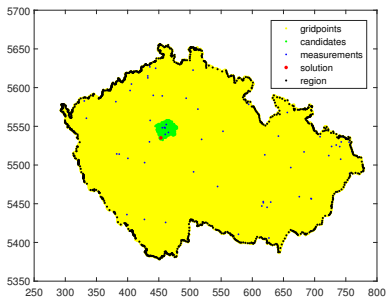
- Síť se skládá z rovnoměrně rozmístěných bodů 1×1 km; celkový počet uzlových bodů $s_0 = g_k$ je $m = 80\,209$.
- Celkový počet kandidátů s_k je rovněž 80 209.
- Celkový počet měřicích bodů je $n = 80$.
- Řešení $\hat{s}^*$, umístění nového měřicího bodu, je na území Prahy.



Praha jako podoblast

Uvažujme jen Prahu jako podoblast G , kde chceme najít nový bod.

- Celkový počet uzlových bodů $s_0 = g_k$ je $m = 80\,209$.
- Celkový počet kandidátů s_k pro Prahu je 577.
- Celkový počet měřicích bodů je $n = 80$.
- Řešení $\hat{s}^*$, umístění nového měřicího bodu, je na JV Prahy.



Je to stejné řešení jako pro celou oblast G .

Porovnání hodnot $v_1(s_0)$ a $\hat{v}_1(s_k)$

Porovnejme (jen tak pro zajímavost) hodnoty

$$v_1(s_0) \quad \text{a} \quad \hat{v}_1(s_k) = \max_{s_0} \bar{v}_1(s_0)$$

Spočítáme a seřadíme hodnoty

- $v_1(s_0)$ vzestupně (hledáme maximum s^*),
- $\hat{v}_1(s_k)$ sestupně (hledáme minimum $\hat{s}^*$).

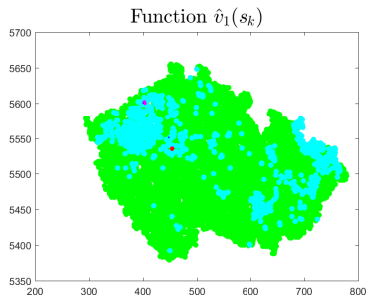
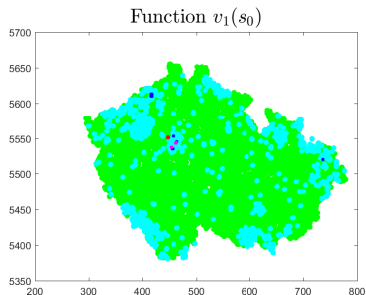
Uvažujme Českou republiku jako oblast G s 80 209 uzlovými body.

Obě funkce jsou vyhodnocovány přes celou síť:

- $v_1(s_0), s_0 \in G$
- $\hat{v}_1(s_k), s_0 \in G, s_k \in G$

Lze pozorovat téměř stejné rozmístění extrémních bodů.

$v_1(s_0)$ vs. $\hat{v}_1(s_k)$



- červené body odpovídají hodnotám s^* a $\hat{s}^*$
- fialové dalším 5 bodům
- modré dalším 10 bodům
- světlemodré dalším 10 000 bodům
- zelené ostatním přibližně 70 000 bodům

Obrázek vpravo je 2D reprezentace 3D obrázku výše.

Min-max kritérium

$$\hat{s}^* = \arg \min_{s_k \in G} \hat{v}_1(s_k) = \arg \min_{s_k \in G} \{ \max_{s_0 \in G} \bar{v}_1(s_0) \}$$

je nejpřirozenější a nejčastěji používané kritérium pro umístění nového měření. Není však jediné.

Kromě nejhoršího případu $\max_{s_0 \in G} \bar{v}_1(s_0)$ lze uvažovat i hodnoty:

- $\min_{s_0 \in G} \bar{v}_1(s_0)$
- průměr přes všechna $s_0 \in G$
- atd.

K tomu účelu použijeme percentily funkce $\bar{v}_1(s_0)$.

Pro libovolného pevného kandidáta $s_k \in G$ uvažujme všechny hodnoty $\bar{v}_1(s_0)$, $s_0 \in G$ (nejen maximum). Nyní projdeme všechny kandidáty $s_k \in G$ a vytvoříme vektor $\min_{s_k \in G} \bar{v}_1(s_0)$.

Percentily 0.0 - 1.0

Pak

- percentil 0.0 odpovídá hodnotě

$$\min_{s_k \in G} \{ \min_{s_0 \in G} \bar{v}_1(s_0) \},$$

- percentil 1.0 odpovídá hodnotě (řešení (10))

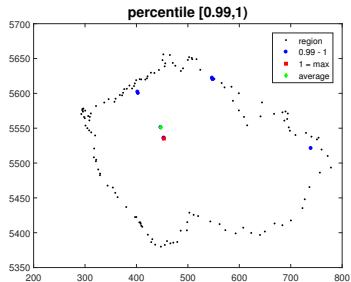
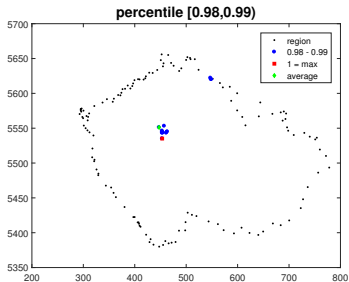
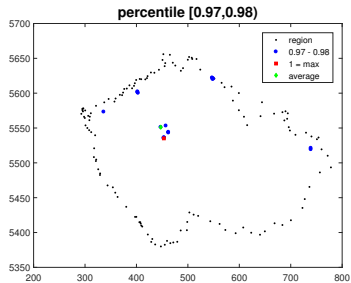
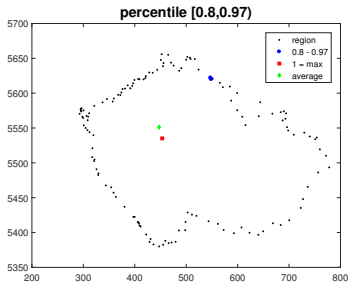
$$\min_{s_k \in G} \{ \max_{s_0 \in G} \bar{v}_1(s_0) \}.$$

Všechny tyto možnosti představují různé funkcionály, které je třeba optimalizovat namísto původního min-max kritéria (10).

Zejména vysoké percentily, řekněme nad 0.8, mohou být někdy atraktivnější alternativou, která se nezaměřuje pouze na nejhorší scénář, ale důkladněji zkoumá i nepříznivé scénáře.

Implementace všech variant představuje jednoduché rozšíření algoritmu pro min-max kritérium.

Percentily vektoru $\min_{s_k \in G} \bar{v}_1(s_0)$



- 1 Úvod
- 2 Datová struktura
- 3 Konstrukce matic
- 4 Statistický model
- 5 Funkce rozptylu chyby predikce
- 6 Výsledky
- 7 Globální minimum**
- 8 Software NOD
- 9 Závěr

Problém ve spojitém prostoru

Hledání umístění nového měřicího bodu se provádí takto:

- vyhodnocení $\hat{v}_1(s_k)$ pro všechny kandidáty s_k ;
- výpočet hodnot $\hat{v}_1(s_k)$ se provádí pro všechny uzlové body s_0 .

Pro velké oblasti je tak tento proces časově příliš náročný.

Kromě toho:

- někdy může být vhodnější najít nový měřicí bod odlišný od uzlových bodů (nepřípustnost, příliš hrubá síť, apod.)

To vede na otázku, zda je možné uvažovat o hledání $\hat{s}^*$ ve spojitém prostoru a předpokládat, že $s_k \in A$ (nikoli $s_k \in G$).

Zkusíme ho najít tak, že

- vytvoříme hrubší síť,
- pomocí optimalizačních metod pro spojitě problémy najdeme globální minimum v dílčích podoblastech,
- za $\hat{s}^*$ vezmeme to nejmenší z nich.

Abychom

- maximalizovali pravděpodobnost nalezení dobrého minima,
- minimalizovali výpočetní složitost,

je třeba pečlivě zvážit následující otázky:

- Hrubá síť a z ní vznikající dílčí podoblasti musí mít vhodnou velikost:
 - příliš malé oblasti zvyšují výpočetní složitost,
 - příliš velké oblasti snižují možnost nalezení dobrého řešení.
- Hledání globálního minima v každé dílčí podoblasti musí probíhat rozumným způsobem:
 - příliš rychlý postup může obejít dobré řešení,
 - příliš pomalý postup může způsobit zbytečně vysokou výpočetní náročnost.
- Při použití metod lokální optimalizace k hledání globálních minim stačí najít lokální minima s menší přesností.

V našem numerickém experimentu pro celou oblast ČR:

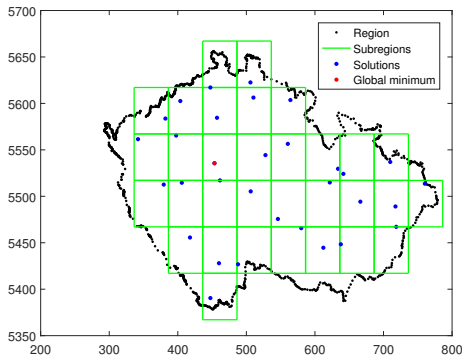
- jsme původní síť zhrubili tak, že jsme vzali každý 50. uzlový bod vodorovně i svisle (vznikla síť 50×50),
- vzniklo 32 dílčích podoblastí, kde jsme hledali globální minima.

Nyní jsme porovnali dva přístupy:

- 1 najít nový měřicí bod $\hat{s}^*$ výpočtem $\hat{v}_1(s_k)$ pro všechny kandidáty s_k (je jich 80 209),
- 2 spočítat globální minima na 32 podoblastech a jako finální řešení $\hat{s}^*$ vzít nejmenší z těchto minim.

Prvotní výsledky ukazují, že je možné najít $\hat{s}^*$ tak, že původní problém převedeme na spojitý a vyřešíme jej pomocí metod globální optimalizace. Stejné řešení lze najít $2,5 \times$ rychleji.

Porovnání obou metod



metoda	všechna s_k	globální minimum
$\min\{\hat{v}_1(s_k)\}$	37.705743	37.705783
$\hat{s}^*$	[453.325, 5535.125]	[453.461, 5535.622]
čas	14:31:37.92	5:55:33.25

- 1 Úvod
- 2 Datová struktura
- 3 Konstrukce matic
- 4 Statistický model
- 5 Funkce rozptylu chyby predikce
- 6 Výsledky
- 7 Globální minimum
- 8 Software NOD**
- 9 Závěr

Vytvořili jsme software NOD (Numerically Optimized Design) pro výpočet hodnot $v_1(s_0)$ a $\hat{v}_1(s_k)$ a určení nového měřicího bodu $\hat{s}^*$. Je napsán ve Fortranu a lze jej volně stáhnout z webové stránky

<https://www.cs.cas.cz/matonoha/?item=../soft/nod/index>

Software se skládá z

- hlavního souboru, vstupních a výstupních souborů a spustitelných souborů
- návodu k použití softwaru a souborů ke stažení
- příkladu ilustrujícího výsledky

Jako příklad uvažujeme Českou republiku jako oblast G obsahující vstupní data, chceme najít umístění nového měřicího bodu v Praze.

Funkce $\hat{v}_1(s_k)$ se vyhodnocuje ve všech uzlových bodech s_0 , přičemž kandidáti s_k se vybírají pouze z Prahy.

Vstupní soubor GRIDPOINTS

NOD10_INP_GRIDPOINTS.TXT

- uzlové body g_k , $k = 1, \dots, m$
- m řádků obsahujících
 - x-souřadnici uzlového bodu, číslo $g_k(i)$, viz (1)
 - y-souřadnici uzlového bodu, číslo $g_k(j)$, viz (1)
 - počet obyvatel v tomto uzlovém bodě, který určuje $g_k \in M$ nebo $g_k \in P$, viz (2)
 - p -dimensionální vektor kovariátů $\tilde{x}_k(g_k)$, viz (3)

Příklad:

450.325	5378.125	0	773.1359863	2.725215435	0.363397855
451.325	5378.125	0	708.7540283	2.751774507	0.302162319
448.325	5379.125	0	839.3939819	2.687866635	0.372509078
...					

NOD10_INP_MEASUREMENTS.TXT

- množina existujících měřicích bodů s_l , $l = 1, \dots, n$
- n řádků obsahujících
 - x-souřadnici měřicího bodu, číslo $s_l(i)$, viz (4)
 - y-souřadnici měřicího bodu, číslo $s_l(j)$, viz (4)

Příklad:

455.65269	5548.19708
465.43877	5542.09691
461.93977	5552.35209
...	

NOD10_INP_THETA.TXT

- kovarianční parametry θ
- 1 řádek obsahující

■ $\phi_P, \sigma_P, \phi_M, \sigma_M, \tau$, viz (6)

Příklad:

95.197 0.798 5.813 4.583 3.262

NOD10_INP_DATA.TXT

– 1 řádek obsahující

- indikátor (limit) určující, kdy je uzlový bod městem, viz (2)

Příklad:

1000

NOD10_INP_SK_ID.TXT

– m řádků obsahujících

- 1 – když je daný uzlový bod přípustný pro umístění nového měřicího bodu, tj. jako kandidát s_k
- 0 – naopak

Příklad:

```
0
0
...
1
0
...
```

Jedná se o uživatelem zadaný vektor složený z čísel 1/0, který udává, zda je daný uzlový bod přípustný pro umístění nového měřicího bodu, tj. zda je kandidátem s_k . V našem příkladu odpovídají hodnoty 1 těm uzlovým bodům, které jsou v Praze.

NOD10_OUTPUT.INF

– hlavní výstupní soubor obsahující základní informace

- celkový počet uvažovaných kandidátů
- maximální hodnota funkce $v_1(s_0)$ přes všechny uzlové body $s_0 \in G$
- optimální umístění nového měřicího bodu
 $\hat{s}^* = \arg \min_{s_k} \{ \max_{s_0 \in G} \bar{v}_1(s_0) \}$
- informace týkající se obsahu výstupních souborů
- výpočetní čas

Výstupní soubor INF

Příklad:

```
TOTAL NUMBER OF CANDIDATES S_K =      577
-----
MAXIMAL VALUE OF V1 OVER ALL GRIDPOINTS:
      MAX{S_O} V1(S_O)                =      49.859439
MINMAX VALUE OF V1BAR OVER ALL GRIDPOINTS:
      MIN{S_K} MAX{S_O} V1BAR(S_O) =      37.705743
OPTIMAL PLACEMENT OF S_K^* :
CENTER INDEX      =      51506
X-COORDINATION    =      453.325
Y-COORDINATION    =      5535.125
-----
NOD10_OUTPUT_V1.CSV = VALUES V1(S_O):
      CENTER INDEX S_O; X-COORD; Y-COORD; VALUE V1(S_O);
NOD10_OUTPUT_V1HAT.CSV = MAX{S_O} V1BAR(S_O):
      INDEX OF S_K; X-COORD; Y-COORD; INDEX OF S_O^*;
      X-COORD; Y-CORD; FUNCTION VALUE;
-----
TIME = 0:04:23.03
```

NOD10_OUTPUT_V1.CSV

- hodnoty $v_1(s_0)$ vypočítané ve všech uzlových bodech $s_0 \in G$
- m řádků obsahujících
 - index uzlového bodu $s_0 = g_k$
 - x-souřadnici tohoto bodu, číslo $g_k(i)$, viz (1)
 - y-souřadnici tohoto bodu, číslo $g_k(j)$, viz (1)
 - hodnotu funkce $v_1(s_0)$

Příklad:

```
1;    450.325;    5378.125;    12.479747;  
2;    451.325;    5378.125;    12.274488;  
3;    448.325;    5379.125;    12.807900;  
...
```

Výstupní soubor V1HAT

NOD10_OUTPUT_V1HAT.CSV

- hodnoty $\hat{v}_1(s_0)$ vypočítané pro kandidáty s_k
- řádky (jejichž počet je dán 1/0 souborem) obsahující
 - index kandidáta s_k
 - x-souřadnici tohoto bodu, číslo $g_k(i)$, viz (1)
 - y-souřadnici tohoto bodu, číslo $g_k(j)$, viz (1)
 - index bodu řešení $\bar{s}^* = \arg \max_{s_0 \in G} \bar{v}_1(s_0)$ pro dané s_k
 - x-souřadnici tohoto řešení
 - y-souřadnici tohoto řešení
 - hodnotu funkce $\hat{v}_1(s_k) = \max_{s_0 \in G} \bar{v}_1(s_0)$

Příklad:

```
50194; 456.325; 5532.125; 52375; 453.325; 5537.125; 44.135043;  
50626; 452.325; 5533.125; 58102; 447.325; 5551.125; 47.477249;  
50627; 453.325; 5533.125; 52375; 453.325; 5537.125; 44.870058;  
...
```

- 1 Úvod
- 2 Datová struktura
- 3 Konstrukce matic
- 4 Statistický model
- 5 Funkce rozptylu chyby predikce
- 6 Výsledky
- 7 Globální minimum
- 8 Software NOD
- 9 Závěr

Náměty k dalšímu zamyšlení:

- Efektivní hledání řešení pomocí technik globální optimalizace namísto prohledávání všech kandidátů (spojitý problém, rychlejší výpočet, ...)
- Umístění více nových měřicích bodů najednou:
Ve funkci $v_1(s_0)$ to vede na rozšíření členů Σ , X , $c(s_0)$ o více než jeden řádek a sloupec.
- Vektorů kovariančních parametrů θ může být více:
Budou příslušná řešení blízko sebe?
- Aktualizace softwaru (nové verze), např.:
 - zahrnutí výpočtu $\hat{s}^*$ pomocí technik globální optimalizace
 - grafický výstup – automatické vygenerování spustitelných souborů (Matlab)
 - ...
- ...



Děkuji za pozornost.



Matonoha C., Brabec M.:

Spatial design for air pollution measurement network optimization.

In preparation.